

## 高分子化合物の重合反応を対象とした逆合成予測モデルの構築

(明大院理工<sup>1</sup>) ○谷脇 寛明<sup>1</sup>・金子 弘昌<sup>1</sup>

Development of retrosynthesis prediction model for polymerization reactions

(<sup>1</sup>Graduate School of Science and Engineering, Meiji University) ○Hiroaki Taniwaki,<sup>1</sup>  
Hiromasa Kaneko,<sup>1</sup>

Research results for polymers in cheminformatics have enabled us to design monomer structures with promising properties for polymers using models that predict the properties of polymers. However, since the monomer structures designed on the computer are virtual structures, it is unclear whether they can actually be synthesized. The objective of this study is to construct a model that predicts the reactants using the monomer structure of the polymer as a product to propose a feasible structure.

To predict the reactions of polymer compounds, we use the reaction data of polymer compounds obtained from PoLyInfo, a polymer database. Since the reaction data is expressed based on SMILES, which is an alphanumeric string of chemical structures, we use Seq2Seq, which is used for language translation, as a model constructing method. We constructed a retrosynthesis prediction model for polymerization reactions and predicted the reactants for existing polymerization reactions and 495 samples could be accurately predicted for 1,095 samples.

*Keywords* : Retrosynthesis; Machine Learning; Polymer Compound

ケモインフォマティクスにおけるポリマーを対象とした研究成果により、ポリマーの物性値を予測するモデルを用いてポリマーが有望な物性値をもつモノマー構造を設計できるようになった。しかしコンピュータ上で設計されたモノマー構造は仮想的な構造であるため実際に合成できるか不明である。実現性の高い構造を提案するためにあるポリマーのモノマー構造を生成物として反応物を予測するモデルを構築することを目的とする。

高分子化合物の反応を予測するため、高分子データベースの PoLyInfo<sup>1)</sup>から入手した高分子化合物の反応データを利用する。反応データは化学構造を英数字で文字列化した SMILES に基づいて表現されているため、モデル構築手法として言語翻訳に使われる Seq2Seq<sup>2)</sup>を利用する。高分子化合物の反応に対応した逆合成予測モデルを構築し既存の高分子化合物の反応物を予測した結果、1,095 サンプル中最大で 495 サンプルを正確に予測できた。

1) <http://polymer.nims.go.jp/>

2) “Found in Translation”: predicting outcomes of complex organic chemistry reactions using neural sequence-to-sequence models. P. Schwaller, T. Gaudin, D. Lanyi, C. Bekas and T. Laino, *Chem. Sci.*, **2018**, 9, 6091